บทที่ 3
วิธีดำเนินการวิจัย

การแก้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นเพื่อหาผลเฉลยโดยประมาณด้วยวิธีเมชเลสที่มีเงื่อนไขจากการวางฟังก์ชันฐาน ผู้วิจัยได้ดำเนินการตามขั้นตอน ดังนี้

1. การแก้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นให้เป็นสมการเชิงเส้นด้วยวิธีเมชเลส
2. การกำหนดค่าพารามิเตอร์และการแก้ปัญหาด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์

การแก้สมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นให้เป็นสมการเชิงเส้นด้วยวิธีเมชเลส

งานวิจัยนี้เลือกใช้รูปสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นคล้ายสมการที่ 2.1 คือ

$$i\frac{\partial \Psi}{\partial t}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}-\lambda|\Psi|^2\Psi \quad = \quad 0 \tag{3.1}$$

เมื่อ $\Psi=\Psi(x,t)$ และมีเงื่อนไขขอบเขต ดังนี้ $\Psi(0,t)=0$ และ $\Psi_x(0,t)=0$ ที่ขอบด้านซ้าย ส่วน $\Psi(1,t)=0$ และ $\Psi_x(1,t)=0$ ที่ขอบด้านขวา

เริ่มต้นโดยการแปลงสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นให้อยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์ด้วยวิธีเมชเลสแบบแคลคูลัสแปรผันรูปแบบอ่อน โดยการคูณสมการที่ 3.1 ด้วยฟังก์ชันทดสอบ $v(x)$

$$\int_0^1 v(x)\left[\, i\frac{\partial \Psi}{\partial t}+\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}-\lambda|\Psi|^2\Psi \,\right]dx \quad = \quad 0 \tag{3.2}$$

และนำสมการที่ 3.2 อินทิเกรตโดยการแยกส่วน จะได้

$$i\int_0^1 v\frac{\partial \Psi}{\partial t}\,dx+\frac{1}{2}\int_0^1 v\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\,dx-\lambda\int_0^1 v|\Psi|^2\Psi\,dx \quad = \quad 0 \tag{3.3}$$

$$i\int_0^1 v\frac{\partial \Psi}{\partial t}\,dx+\frac{1}{2}\int_0^1 v\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\,dx-\lambda\int_0^1 v|\Psi|^2\Psi\,dx \quad = \quad 0 \tag{3.4}$$

$$i\int_0^1 v\frac{\partial\Psi}{\partial t}dx+\frac{1}{2}\left(v\frac{\partial\Psi}{\partial x}\bigg|_0^1-\int_0^1\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}dx\right)-\lambda\int_0^1 v|\Psi|^2\Psi\,dx \quad=\quad 0 \tag{3.5}$$

$$i\int_0^1 v\frac{\partial\Psi}{\partial t}dx+\frac{1}{2}v\frac{\partial\Psi}{\partial x}\bigg|_0^1-\frac{1}{2}\int_0^1\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}dx-\lambda\int_0^1 v|\Psi|^2\Psi\,dx \quad=\quad 0 \tag{3.6}$$

สมการที่ 3.6 พจน์ $\frac{1}{2}v\frac{\partial\Psi}{\partial x}\bigg|_0^1$ จะมีค่าเท่ากับศูนย์ เนื่องจากเงื่อนไขขอบเขต ดังนั้นเขียนสมการได้ใหม่คือ

$$i\int_0^1 v\frac{\partial\Psi}{\partial t}dx-\frac{1}{2}\int_0^1\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}dx-\lambda\int_0^1 v|\Psi|^2\Psi\,dx \quad=\quad 0 \tag{3.7}$$

$$\int_0^1\left[iv\frac{\partial\Psi}{\partial t}-\frac{1}{2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial v}{\partial x}-\lambda v|\Psi|^2\Psi\right]dx \quad=\quad 0 \tag{3.8}$$

รูปของผลเฉลยโดยประมาณ $\hat{\Psi}$ คือ

$$\hat{\Psi} \quad=\quad \sum_{j=1}^{N}\alpha_j(t)\phi_j(x) \tag{3.9}$$

โดยมีสังยุคเป็น

$$\hat{\Psi}^* \quad=\quad \sum_{j=1}^{N}\alpha_j^*(t)\phi_j^*(x) \tag{3.10}$$

เมื่อ $\alpha_j(t)$ คือ สัมประสิทธิ์ของฟังก์ชันฐานที่ขึ้นกับเวลา

$\phi_j(x)$ คือ ฟังก์ชันฐานที่ขึ้นกับตำแหน่ง

N คือ จำนวนฟังก์ชันฐาน

จากนั้นนำผลเฉลยโดยประมาณในสมการที่ 3.9 และสมการที่ 3.10 แทนค่าในสมการที่ 3.8 จะได้

$$\int_0^1 \left[i\,v \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} \phi_j - \frac{1}{2} \frac{\partial v}{\partial x} \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \frac{\partial \phi_j}{\partial x} - \lambda\, v \sum_{j,k,l=1}^{N} \alpha_j \alpha_k^* \alpha_l\, \phi_j \phi_k^* \phi_l \right] dx \quad = \quad 0 \qquad (3.11)$$

สมการที่ 3.11 คือ รูปสมการอินทิกรัลรูปทั่วไปสำหรับสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้นของสมการที่ 3.1 สำหรับงานวิจัยนี้เลือกค่าฟังก์ชันทดสอบคือ $v = \phi_i$ จึงเขียนสมการที่ 3.11 ได้ใหม่

$$\int_0^1 \left[i\,\phi_i \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} \phi_j - \frac{1}{2} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \frac{\partial \phi_j}{\partial x} - \lambda\, \phi_i \sum_{j,k,l=1}^{N} \alpha_j \alpha_k^* \alpha_l\, \phi_j \phi_k^* \phi_l \right] dx \quad = \quad 0 \qquad (3.12)$$

ขั้นตอนต่อไปจะทำการแปลงสมการที่ 3.12 ให้เป็นสมการเชิงอนุพันธ์ในรูปเมตริกซ์ โดยเริ่มจากพจน์ที่ 1 ได้ว่า

$$\int_0^1 i\,\phi_i \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial \alpha_j}{\partial t} \phi_j \, dx \quad = \quad \sum_{j=1}^{N} A_{ij} \dot{\alpha}_j \qquad (3.13)$$

จากสมการที่ 3.13 จะได้ว่า

$$\frac{\partial \alpha_j}{\partial t} \quad = \quad \dot{\alpha}_j \qquad (3.14)$$

$$A_{ij} \quad = \quad i \int_0^1 \phi_i \phi_j \, dx \qquad (3.15)$$

$$\sum_{j=1}^{N} A_{ij} \dot{\alpha}_j \quad = \quad A_{11}\dot{\alpha}_1 + A_{12}\dot{\alpha}_2 + A_{13}\dot{\alpha}_3 + \ldots \quad = \quad \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \ldots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\alpha}_1 \\ \dot{\alpha}_2 \\ \dot{\alpha}_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \qquad (3.16)$$

พจน์ต่อไป คือ พจน์ที่ 2 ได้ว่า

$$\int_0^1 \frac{1}{2} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \sum_{j=1}^{N} \alpha_j \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \, dx \quad = \quad \sum_{j=1}^{N} B_{ij} \alpha_j \qquad (3.17)$$

จากสมการที่ 3.17 จะได้ว่า

$$\phi_i' = \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \tag{3.18}$$

$$B_{ij} = \frac{1}{2}\int_0^1 \phi_i'\phi_j'\,dx \tag{3.19}$$

$$\sum_{j=1}^{N} B_{ij}\alpha_j = B_{11}\alpha_1 + B_{12}\alpha_2 + B_{13}\alpha_3 + \ldots = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} & B_{13} & \ldots \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{3.20}$$

พจน์สุดท้าย คือ พจน์ที่ 3 ได้ว่า

$$\int_0^1 \lambda\phi_i \sum_{j,k,l=1}^{N} \alpha_j\alpha_k^*\alpha_l\,\phi_j\phi_k^*\phi_l\,dx = \sum_{j=1}^{N} C_{ij}\alpha_j \tag{3.21}$$

จากสมการที่ 3.21 จะได้ว่า

$$C_{ij} = \sum_{k,l=1}^{N} \lambda\alpha_k^*\alpha_l \int_0^1 \phi_i\phi_j\phi_k^*\phi_l\,dx \tag{3.22}$$

$$\sum_{j=1}^{N} C_{ij}\alpha_j = C_{11}\alpha_1 + C_{12}\alpha_2 + C_{13}\alpha_3 + \ldots = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & \ldots \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{3.23}$$

จากนั้นนำสมการที่ 3.15 สมการที่ 3.19 และสมการที่ 3.22 แทนในสมการที่ 3.12 จะได้สมการเชิงอนุพันธ์ในรูปเมตริกซ์ คือ

$$\underline{A}\dot{\underline{\alpha}} = \underline{B}\underline{\alpha} + \underline{C(\alpha)}\underline{\alpha} \tag{3.24}$$

และเมื่อนำสมการที่ 3.24 คูณด้วยส่วนกลับของ $\underline{A}$ ทั้งสองข้างจะได้

$$\dot{\underline{\alpha}} = \underline{A}^{-1}\left[\underline{B}+\underline{C(\alpha)}\right]\underline{\alpha} \tag{3.25}$$

รูปสมการที่ 3.25 คือ สมการเชิงอนุพันธ์ในรูปชัดแจ้ง (Explicit) เมื่อ $\underline{A}$ เป็นเมตริกซ์ A_{ij}, $\underline{B}$ เป็นเมตริกซ์ B_{ij}, $\underline{C}$ เป็นเมตริกซ์ C_{ij} และ $\underline{\alpha}$ เป็นเมตริกซ์ α_i

สำหรับงานวิจัยนี้ ผู้วิจัยเลือกใช้ฟังก์ชันฐานเกาส์เซียน ซึ่งเป็นฟังก์ชันฐานเชิงรัศมี โดยมีรูปฟังก์ชันฐานเกาส์เซียนคือ

$$\phi_i(\bar{r}) = e^{-cr^2} \tag{3.26}$$

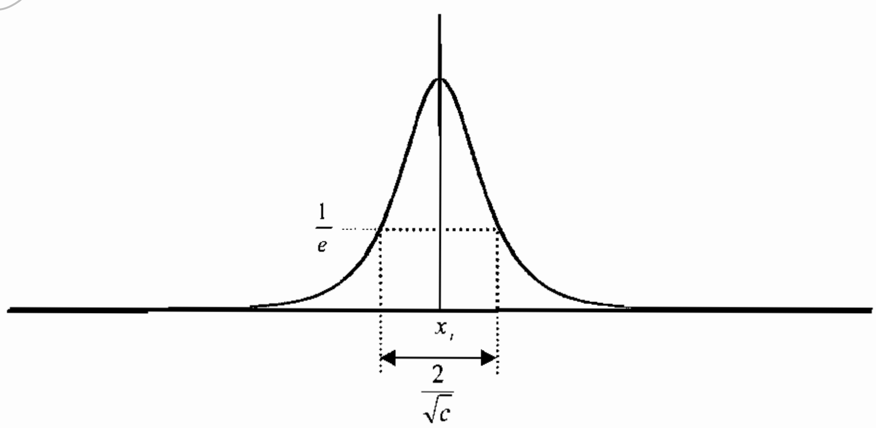
ในกรณี 1 มิติ

$$r^2 = (x-x_i)^2 \tag{3.27}$$

ปัญหานี้จะพิจารณากรณี 1 มิติ จึงเขียนรูปสมการที่ 3.26 ได้ใหม่

$$\phi_i(x) = e^{-c(x-x_i)^2} \tag{3.28}$$

$$\phi_i' = -2c(x-x_i)e^{-c(x-x_i)^2} \tag{3.29}$$



ภาพที่ 3-1 ฟังก์ชันฐานเกาส์เซียน

จากนั้นทำการแทนค่าในสมการที่ 3.15 ด้วยสมการที่ 3.28 และแทนค่าเงื่อนไขขอบเขต จะได้

$$A_{ij} = i\int_0^1 e^{-c(x-x_i)^2} e^{-c(x-x_j)^2}\,dx \tag{3.30}$$

$$A_{ij} = -\frac{i}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2c}}\,e^{-\frac{1}{2}c(x_i-x_j)^2}\left\{\mathrm{erf}\left[\frac{\sqrt{2c}}{2}(x_i+x_j-2)\right]-\mathrm{erf}\left[\frac{\sqrt{2c}}{2}(x_i+x_j)\right]\right\} \tag{3.31}$$

จากนั้นนำสมการที่ 3.28 แทนในสมการที่ 3.19 และแทนค่าเงื่อนไขขอบเขต จะได้

$$B_{ij} = \frac{1}{2}\int_0^1 \frac{\partial e^{-c(x-x_i)^2}}{\partial x}\frac{\partial e^{-c(x-x_j)^2}}{\partial x}\,dx \tag{3.32}$$

$$B_{ij} = \frac{1}{2}\int_0^1\left[-2c(x-x_i)e^{-c(x-x_i)^2}\right]\left[-2c(x-x_j)e^{-c(x-x_j)^2}\right]dx \tag{3.33}$$

$$B_{ij} = \frac{\sqrt{c}}{8}e^{-c(2+x_i^2+x_j^2)}\Big\langle 2\sqrt{c}\left[(x_i+x_j-2)e^{2c(x_i+x_j)}-(x_i+x_j)e^{2c}\right]$$

$$+\sqrt{2\pi c}\,e^{\frac{c}{2}\left[4+(x_i+x_j)^2\right]}\left[(x_i+x_j)^2-\frac{1}{c}\right]\left\{\mathrm{erf}\left[\frac{\sqrt{2c}}{2}(x_i+x_j-2)\right]-\mathrm{erf}\left[\sqrt{\frac{c}{2}}(x_i+x_j)\right]\right\}\Big\rangle$$

(3.34)

สุดท้ายนำสมการที่ 3.28 แทนในสมการที่ 3.22 และแทนค่าเงื่อนไขขอบเขต จะได้

$$C_{ij} = \lambda\sum_{k,l=1}^{N}\alpha_k^*\alpha_l\int_0^1 e^{-c(x-x_i)^2}e^{-c(x-x_j)^2}e^{-c(x-x_k)^2}e^{-c(x-x_l)^2}\,dx \tag{3.35}$$

$$C_{ij} = \frac{\lambda}{4}\sqrt{\frac{\pi}{c}}\sum_{k,l=1}^{N}\left\{\alpha_k^*\alpha_l e^{-\frac{c}{4}\left[(x_i-x_j)^2+(x_l-x_j)^2+(x_j-x_k)^2+(x_l-x_i)^2+(x_i-x_k)^2+(x_l-x_k)^2\right]}\right\}$$

$$\left\{\mathrm{erf}\left[\frac{\sqrt{c}}{2}\left(x_i+x_j+x_k+x_l-4\right)\right]+\mathrm{erf}\left[\frac{\sqrt{c}}{2}\left(x_i+x_j+x_k+x_l\right)\right]\right\} \tag{3.36}$$

ขั้นตอนต่อไปเป็นการหาค่าสัมประสิทธิ์ของฟังก์ชันฐาน α จากการกำหนดเงื่อนไขเริ่มต้นที่ $t = 0$ สามารถเขียนสมการที่ 3.9 ได้ใหม่

$$\hat{\Psi}(0) = \sum_{j=1}^{N}\alpha_j(0)\phi_j(x) = f(x) \tag{3.37}$$

จากเงื่อนไขตั้งต้น $f(x)$ ที่ใช้ในงานวิจัยนี้อยู่ในรูปไฮเพอร์โบลิกเซแคนต์ (Hyperbolic Secant)

$$f(x) = A_0\,\mathrm{sech}\left[k(x-0.5)\right] \tag{3.38}$$

ซึ่งเป็นฟังก์ชันที่นิยมใช้อธิบายโซลิตอนที่มักปรากฏในปัญหาทางฟิสิกส์ที่อธิบายด้วยสมการชเรอดิงเงอร์แบบไม่เป็นเชิงเส้น เช่น งานวิจัยของ Lott et al. (2009)

กำหนดให้ $A_0 = 1$ และ $k = 25$

จากนั้นคูณสมการที่ 3.37 ด้วย $\int_0^1 \phi_i^*(x)dx$ ทั้งสองข้าง จะได้

$$\int_0^1 f(x)\phi_i^*(x)dx = \sum_{j=1}^{N}\alpha_j(0)\int_0^1 \phi_i^*(x)\phi_j(x)dx \tag{3.39}$$

เมื่อ

$$G_i = \int_0^1 f(x)\phi_i^*(x)dx \tag{3.40}$$

$$H_{ij} = \int_0^1 \phi_i^*(x)\phi_j(x)dx \tag{3.41}$$

ดังนั้นเขียนสมการที่ 3.39 ในรูปเมตริกซ์ได้

$$\underline{G} = \underline{H}\underline{\alpha(0)} \tag{3.42}$$

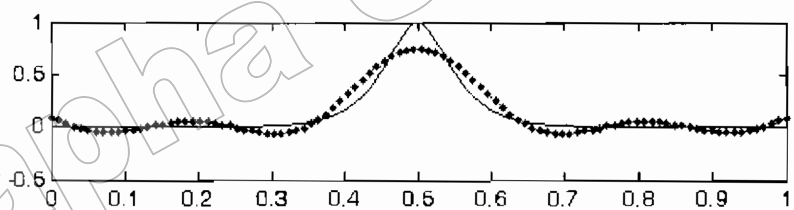
เมื่อ $\underline{G}$ เป็นเมตริกซ์ G_i, $\underline{H}$ เป็นเมตริกซ์ H_{ij} และ $\underline{\alpha(0)}$ เป็นเมตริกซ์ $\alpha_i(0)$ ซึ่งค่า $\underline{H}$ คำนวณได้จาก

$$H_{ij} = \frac{A_{ij}}{i} \tag{3.43}$$

เมื่อนำสมการที่ 3.42 คูณด้วยส่วนกลับของ $\underline{H}$ ทั้งสองข้าง จะได้

$$\underline{\alpha(0)} = \underline{H}^{-1}\underline{G} \tag{3.44}$$

จากนั้นจึงนำค่าสัมประสิทธิ์ของฟังก์ชันฐาน α ที่เวลาตั้งต้นจากสมการที่ 3.44 ไปใช้ในการแก้สมการเชิงอนุพันธ์ในสมการที่ 3.25 ต่อไป



ภาพที่ 3-2 การเปรียบเทียบผลเฉลย (เส้นทึบ) กับผลเฉลยโดยประมาณ (เส้นประ) ที่เวลาเริ่มต้นของจำนวนฟังก์ชันฐาน $N = 10$ และค่าพารามิเตอร์ของฟังก์ชันฐาน $c = 25$

การกำหนดค่าพารามิเตอร์และการแก้ปัญหาด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์

การแก้ปัญหาด้วยโปรแกรมสำเร็จรูปทางคณิตศาสตร์ มีขั้นตอนดังนี้

1. การกำหนดค่าพารามิเตอร์กายภาพ (λ) จำนวนฟังก์ชันฐาน (N) และค่าพารามิเตอร์ของฟังก์ชันฐาน (c) ที่ค่าต่าง ๆ ดังนี้

1.1 การกำหนดค่าพารามิเตอร์กายภาพ มีค่าดังนี้ -200, -150, -100, -50, 0, 50, 100, 150 และ 200

1.2 การกำหนดจำนวนฟังก์ชันฐาน มีค่าดังนี้ 5, 10, 25, 50, 75 และ 100

1.3 การกำหนดค่าพารามิเตอร์ของฟังก์ชันฐาน มีค่าดังนี้ 25, 50, 75, 100, 150, 200, 250, 300 และ 350

จากความสัมพันธ์ของค่าที่กำหนด จะพิจารณาผลเฉลยโดยประมาณและเวลาที่ใช้ในการคำนวณ

2. คำนวณหาค่า $\underline{G}$ ในสมการที่ 3.42 ด้วยวิธีคำนวณเชิงตัวเลขที่เรียกว่า กฎสี่เหลี่ยมคางหมู (Trapezoidal rule) ซึ่งเป็นวิธีการประมาณค่าอินทิเกรตวิธีหนึ่ง (Gerald & Wheatley, 2004) ส่วนการคำนวณค่า $\underline{H}$ เพื่อหาเงื่อนไขตั้งต้น $\underline{\alpha}$

3. หาค่าสัมประสิทธิ์ที่ขึ้นกับเวลาของฟังก์ชันฐาน $\alpha_i(t)$ ในสมการที่ 3.25 ซึ่งอยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์สามัญอันดับหนึ่งด้วยวิธีรุงเง-คุตตา อันดับ 4 และ 5 เพื่อหาคำตอบของสมการที่ 3.25 (Gerald & Wheatley, 2004) และสำหรับแต่ละเวลาหา $\underline{A}$, $\underline{B}$ และ $\underline{C}$ จากสมการที่ 3.15, สมการที่ 3.19 และสมการที่ 3.22 ตามลำดับ